

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІНФОРМАТИКА, МАТЕМАТИКА,
АВТОМАТИКА

ІМА :: 2016

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 18–22 квітня 2016 року)



Суми
Сумський державний університет
2016

Інтерполяція даних структурного аналізу за допомогою сплайнів

Шовкопляс О.А., *старший викладач*; Виноградов М.О., *студент*
Сумський державний університет, м. Суми

У роботі модифікований авторський програмний пакет “SpecDec” для аналізу складних профілів на етапі точкової апроксимації експериментальних даних.

Апаратурний рентгенодифракційний спектр представляє собою задану таблично залежність інтенсивності дифракційного відбиття від кута сканування $I = f(2\theta)$ для великої кількості (близько 10^3) значень аргументу $2\theta_i$, $i = 0 - n$. При нескінченному збільшенні порядку інтерполяційного полінома він дає досить значну похибку, крім того, істотно збільшується час проведення обчислень. У цьому випадку більш ефективним є використання кубічних сплайнів. Граничні умови – природні: $f''(2\theta_0) = f''(2\theta_n) = 0$.

Досліджуваний кутовий діапазон дифракційного спектра розбивається експериментальними значеннями аргументу на n проміжків, на кожному з яких для $2\theta_{i-1} < 2\theta < 2\theta_i$ апроксимуюча функція задається поліномом третього степеня

$$f(2\theta) = a_i + b_i(2\theta - 2\theta_i) + c_i(2\theta - 2\theta_i)^2 + d_i(2\theta - 2\theta_i)^3. \quad (1)$$

Коефіцієнти полінома (1) a_i , b_i , c_i , d_i підбираються таким чином, щоб на границях проміжків функція, її перша та друга похідні були неперервними. Також є можливість задати граничні умови – значення першої або другої похідної на границях проміжків. Для розв’язання отриманої системи $4n$ лінійних рівнянь з тридіагональною матрицею використаний метод прогонки (або алгоритм Томаса), який є спрощенням методу Гаусса та має лінійний час роботи.

Даний програмний продукт написаний мовою програмування Java з використанням таких бібліотек як ControlsFX та jfxtras для візуального оформлення, apache.commons-math3-математичної бібліотеки – для швидкого виконання арифметичних дій за допомогою спеціальних функцій. Також була використана бібліотека JFoenix, що дозволило побудувати застосунок у концепції material design. Проект побудований засобами системи Maven.

Робота виконана в рамках НДР № 0115U000508, що фінансується із коштів державного бюджету Міністерством освіти і науки України.